معادلة شرودنجر :

تنص نظرية دي برولي على أن جسيماً كتلته (m) ويتحرك بسرعة مقدارها (v) يصاحبه انتشار موجي تعطى طول موجته بالمعادلة .

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

حيث h هو ثابت بلانك و $P = mv$ هو الزخم الخطي للجسم أي : $\lambda = \frac{h}{P}$.

إن المعنى الحقيقي لهذه النظرية هو أن الجسيمات الدقيقة (وتعني الإلكترونات هنا) تتصرف أحياناً كموجات ، وبدراسة الخواص الموجية المصاحبة لجسم متحرك تحت تأثير قوة الجذب من وجود معادلة تصف كيفية انتشار هذه الموجات . وقد وضع شرودنجر هذه المعادلة والتي عرفت باسمه وعبر عن الصفة الموجية للجسم المتحرك بدالة هي $\psi(x,t)$ وسماها دالة الموجة . وتعتبر معادلة شرودنجر أهم معادلة في ميكانيك الكم وهي الأيسر والأكثر استعمالاً من الصيغ الأخرى التي وضعها كل من ديراك وهايزنبرغ .

يمكن الحصول على معادلة شرودنجر عن طريقين . الأول هو استخدام المعادلة الموجية المشتقة من قوانين الطبيعة الفيزياء الكلاسيكية بالرجوع إلى الطبيعة الموجية للجسيمات الدقيقة التي جاء بها دي برولي . إن أبسط أنواع الموجات هي تلك الناتجة عن تذبذب وتر مشدود لا نهائية حيث يعطى طول الموجة بالمعادلة الآتية :

$$\lambda = \frac{2L}{n}$$

حيث λ هو طول الموجة و L هو طول الوتر و n العدد الصحيح التي تكون فيه عدد العقد مساوية للصفر . وحسب قوانين الفيزياء الكلاسيكية فإن إزاحة أجزاء الوتر المختلفة تعطى بالمعادلة

$$\psi = A \sin\frac{2\pi x}{\lambda} \cos 2\pi\nu t \qquad (\text{ج}) \qquad (1)$$

حيث A ثابت يساوي أقصى سعة الموجة و ψ هي دالة تصف ما تقدم عليه الموجة في لحظة ما و ν هو التردد (أو التواتر) .

إن المعادلة (ج) هي حل المعادلة التفاضلية الآتية :

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2} A \sin\frac{2\pi x}{\lambda} \cos 2\pi\nu t$$

أي أن

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi \qquad \text{أو} \qquad \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{4\pi^2\psi}{\lambda^2} = 0$$

وفي الحالات التي تكون فيها الكميات المقاسة مستقلة عن الزمن (كما هو في مسائل ميكانيك الكم) . يمكن أن نكتب المعادلة السابقة (كمعادلة تفاضلية جزئية) .

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{4\pi^2\psi}{\lambda^2} = 0 \qquad (2)$$

وبما أن $\lambda = \frac{h}{p}$ إذن يمكن كتابة هذه المعادلة على الشكل الآتي .

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{4\pi^2 p^2\psi}{h^2} = 0 \qquad (3)$$

وبما أن الطاقة الكلية للمنظومة هي التي تهمنا فإننا سوف نعوض في المعادلة (3) عن الطاقة الكلية $E = T + U$ (حيث E هي الطاقة الكلية و T الطاقة الحركية و U هي الطاقة الكامنة) .

أي أن

$$E = \frac{p^2}{2m} + U$$

ومنه

$$p^2 = (E - U)\,2m$$

ويمكن كتابة المعادلة (3) على الشكل التالي:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-U)\psi = 0$$

وبالتعويض $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ نحصل:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0 \quad (4)$$

وهي ما تسمى بمعادلة شرودنجر للجسيم المتحرك في اتجاه واحد (x).

وعمومًا فإن معادلة شرودنجر في الاتجاهات الثلاث مشتقة من المعادلة (4) على الشكل التالي: (5)

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0$$

والطريقة الثانية هو استنتاج معادلة شرودنجر من الفروض العامة لميكانيك الكم.

حيث نعلم من فروض آلية الكم أنه يعني كون ψ هي دالة ذاتية للمؤثر $\hat{A}$ هو أن تحقق المعادلة الآتية

$$\hat{A}\psi(q) = E\,\psi(q)$$

حيث E هي القيمة الذاتية. وإذا كانت طاقة المنظومة هي ما يعنينا في الدراسة فإنه يجعل $\hat{A}$ في هذه الحالة هو $\hat{H}$ (هاملتون المؤثر)، أي أن

$$\hat{H}\psi(q) = E\,\psi(q).$$

فإذا اعتبرنا جسيمًا كتلته m فإن طاقة الحركة هي $T = \frac{p^2}{2m}$ وطاقة الجهد هي U

ويكون الطاقة الكلية هي

$$E = T + U = \frac{p^2}{2m} + U$$

وبالتعويض عن الزخم بدلالته في آلية الكم، نجد أن:

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + U$$

أي أن

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U\psi = E\psi$$

أو يمكن كتابتها على الشكل الآتي.

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + (E-U)\psi = 0$$

وهي نفس العلاقة (5) التي حصلنا عليها من الطريقة ~~الطريقة~~ الكلاسيكية.

وكتطبيق لفروض آلية الكم ندرس جسيم متحرك في صندوق (جهد) ذي بعد واحد. لنتصور جسيمًا كتلته m متحرك في الاتجاه X ويكون في صندوق يتحرك على المحور X وليكن طول ضلع هذا الصندوق هو a وأن الجهد V داخل هذا الصندوق يساوي صفرًا، والجهد خارج الصندوق يصل إلى ما لا نهاية، أي أن الجسيم سيبقى دائمًا داخل الصندوق الذي سيتحرك من البعد X ($x=0, x=a$). فإذا كانت طاقة الجسيم الكلية هي E وطاقة الجهد هي $V=0$ داخل الصندوق و $V=\infty$ خارج الصندوق، فإن المعادلة الموجية (معادلة شرودنجر) لهذا الجسيم خارج الصندوق هي

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+(E-\infty)\psi=0$$

أي أن

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-\infty)\psi=0$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=\infty\psi$$

وواضح أن حل هذه المعادلة هو $\psi=0$ أي أنه ليس هناك دالة فاصلة لشرط ψ يمكن أن تنطبق عليه لو كانت إذا تمت مضاعفة مرتين ومعنى أن $\psi=0$ أن احتمال وجود الجسيم خارج الصندوق يساوي صفراً. وحالته داخل الصندوق $V=0$ أي أن.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0$$

فإذا وضعنا أن $\alpha^2=\frac{2m}{\hbar^2}E$ فتصبح المعادلة على النحو الآتي.

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi=-\alpha^2\psi$$

ولهذه المعادلة عدة حلول مقبولة وهي أي حل تفاضله ψ يعطي نفس الدالة مضروبة في ثابت عند مفاضلته مرتين وهذه الدوال هي مثل الدوال الآتية:

$\sin\alpha x$ و $\cos\alpha x$ و $e^{\alpha x}$

وسوف نأخذ من هذه الحلول المقبولة الحل:

$$\psi=A\sin\alpha x$$

من الشروط الحدودية في هذه المسألة هي أن $\psi_0=\psi_a=0$

أي أن

$$\psi_0=A\sin 0\alpha=0$$

$$\psi_a=A\sin a\alpha=0$$

ولكي تكون الدالة ψ_a مساوية للصفر يجب أن يكون $a\alpha=n\pi$. إذن

$$\alpha=\frac{n\pi}{a}\quad,\quad \alpha^2=\frac{n^2\pi^2}{a^2}$$

وبالتالي نستطيع أن نحصل على دالة ذاتية (مقننة) لكل عدد صحيح لـ (n)

أي

$$\psi_n=A\sin\frac{n\pi x}{a}$$

ونستطيع أن نحسب الطاقة E_n على النحو الآتي:

$$\alpha^2=\frac{n^2\pi^2}{a^2}=\frac{2mE_n}{\hbar^2}\Rightarrow E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

وبما أن $\hbar=\frac{h}{2\pi}$ إذن

$$E_n=\frac{n^2h^2}{8ma^2}$$

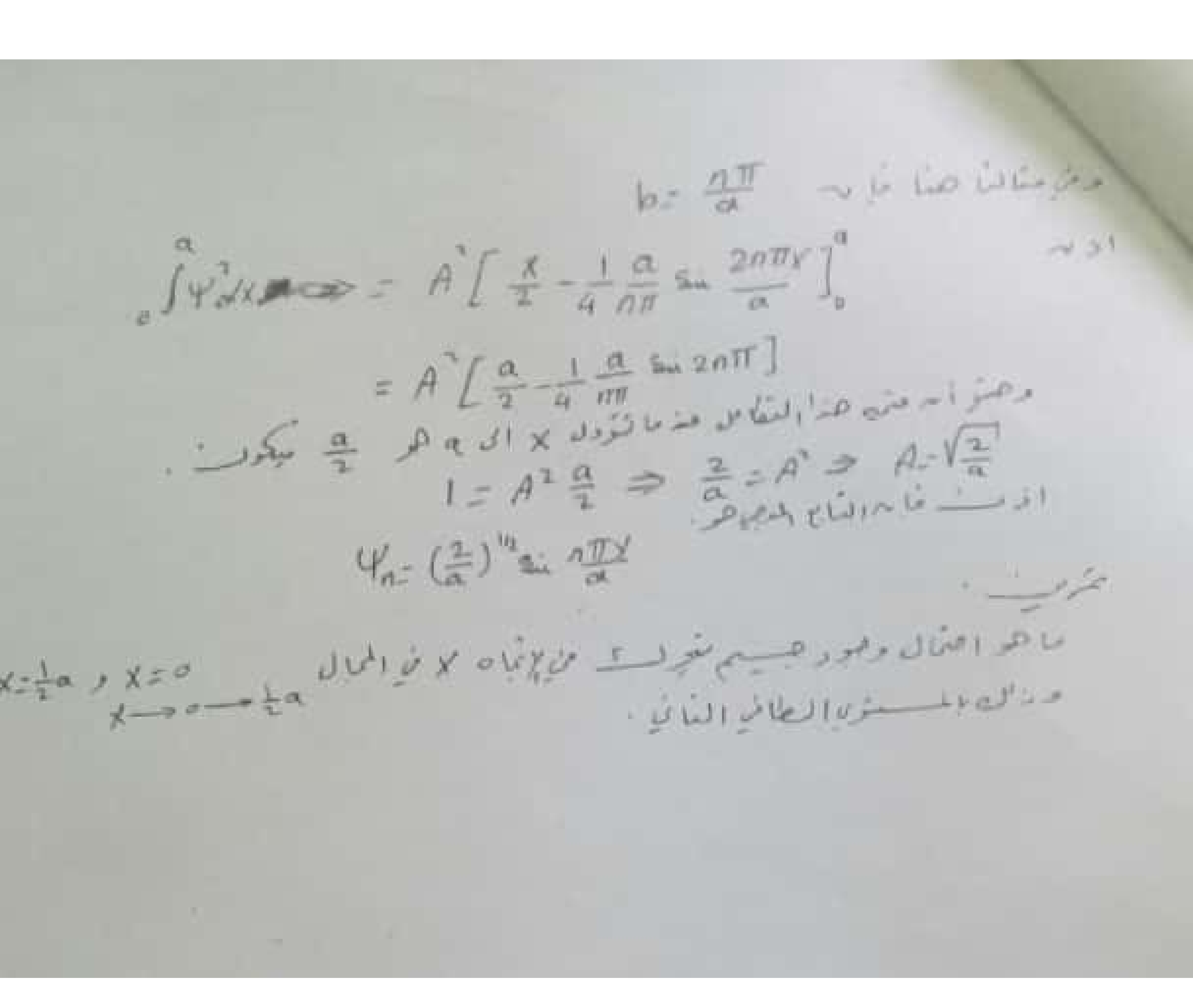
لإيجاد قيمة الثابتة A سوف نطبق شرط الدالة الجيدة ψ وهي أن

$$\int_0^a\psi^2 d\tau=1\Rightarrow\int_0^a\psi^2dx=\int_0^a A\sin\frac{n\pi x}{a}\cdot A\sin\frac{n\pi x}{a}\,dx=$$

$$=A^2\int_0^a\left[\sin\frac{n\pi x}{a}\right]^2dx=1$$

وسوف نعتمد على القاعدة العامة في التكاملات الرياضية:

$$\int_0^a\sin^2 bx\,dx=\frac{x}{2}-\frac{1}{4b}\sin(2bx)-0$$


ومن معادلتنا هنا فإن $b = \frac{n\pi}{a}$

اذن

$$\int_0^a \psi^2 dx = A^2\left[\frac{x}{2} - \frac{1}{4}\frac{a}{n\pi}\sin\frac{2n\pi x}{a}\right]_0^a$$

$$= A^2\left[\frac{a}{2} - \frac{1}{4}\frac{a}{n\pi}\sin 2n\pi\right]$$

ومعنى ان ناتج هذا التكامل عندما نعوض X الى a هو $\frac{a}{2}$ سيكون .

$$1 = A^2\frac{a}{2} \Rightarrow \frac{2}{a} = A^2 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

اذن فأن الناتج الحقيقي

$$\psi_n = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2}\sin\frac{n\pi x}{a}$$

تمرين :

ما هو احتمال وجود جسيم طوله من ψ_2 بين X في المجال $x = 0$, $x = \frac{1}{2}a$

وذلك بالمستوى الطاقي الثاني .

$x \to 0 \to \frac{1}{2}a$